

Результаты исследования показали, что удельная скорость растворения вышеуказанных материалов изменяется в зависимости, как от состава сплава, так и от плотности тока, также она зависит от величины приращение поверхностной температуры в сравнении с объемной. Приращение поверхностной температуры рассчитывалось по [2] на основе измеренных значений плотности тока, потенциала растворения и скорости вращения ВДЭ.

Сравнительные исследования состава поверхностных слоев проведенные с использованием микрорентгеноспектрального (EDS) и рентгенофазового анализа позволили оценить их изменения в процессе высокоскоростного анодного растворения и определить влияние составов электролитов и условий обработки на технологические показатели ЭХРО.

1. Б.П.Саушкин. Физико-химические методы обработки в производстве газотурбинных двигателей. М., 2002.
2. Дикусар А.И., Энгельгардт Г.Р., Молин А.Н. Термокинетические явления при высокоскоростных электродных процессах. Кишинев, 1989.

## СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Bi}_5\text{Nb}_{3-3x}\text{M}_{3x}\text{O}_{15-\Delta}$ (М – Cu, Ni, Cr).

*Пименов А.Л., Пийр И.В., Жук Н.А.*

Сыктывкарский государственный университет

Целью данной работы является исследование возможности образования твердых растворов ниобата висмута состава  $\text{Bi}_5\text{Nb}_{3-3x}\text{M}_{3x}\text{O}_{15-\Delta}$  (М – Cr, Cu, Ni) со слоистой перовскитоподобной структурой и изучение их электрофизических свойств.

Синтез твердых растворов проводили по стандартной керамической технологии, путем высокотемпературной обработки отпрессованной стехиометрической смеси оксидов  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Nb}_2\text{O}_5$ , CuO, NiO,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  согласно уравнениям твердофазных реакций, при температуре 650 °С и 950 °С в течение 50 часов.

Исследование полученных препаратов методом рентгенофазового анализа на рентгенодифрактометре ДРОН-4-13 ( $\text{CuK}_\alpha$  - излучение) позволило установить, что образцы при  $x \leq 0.08$  являются однофазными и кристаллизуются в слоистой перовскитоподобной структуре  $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$ .

Для всех твердых растворов определены параметры элементарной ячейки. Установлено, что с ростом концентрации атомов переходного элемента  $x$  твердые растворы испытывают моноклинное искажение элементарной ячейки.

Измерение электрофизических свойств (емкости и проводимости) проведено в интервале температур 300 – 1000 К на приборе, предназначенном для автоматического измерения параметров емкостных объектов. Был использован измеритель LCS цифровой E7-18 ( $\omega=1$  кГц). Температура в рабочем объеме контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, подключенной к цифровому вольтметру.

Исследована температурная и концентрационная зависимости диэлектрической проницаемости и электропроводности  $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$  и твердых растворов на его основе. При температурах выше 800 К с ростом концентрации допированного металла наблюдается резкое увеличение значений диэлектрической проницаемости и удельной электропроводности.

Ионная составляющая электропроводности твердых растворов сложных ниобатов висмута активируется для образцов, содержащих хром при температурах 400 К и выше; для образцов, содержащих медь или никель – 500 К и выше. Увеличение десятичного логарифма электропроводности в интервале температур 300-1000 К увеличивается в среднем на 5 порядков.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ $\text{Bi(III)}$ ИЗ АКВА-ТИОМОЧЕВИННЫХ РАСТВОРОВ

*Шапник А.М., Кузнецов А.М.*

Казанский государственный технологический университет

В рамках метода функционала плотности (версия B3LYP) с учетом влияния полярного растворителя в модели поляризованного континуума PCM с использованием программного пакета GAUSSIAN 98 проведены расчеты комплексов  $[\text{Bi}(\text{H}_2\text{O})_x(\text{SC}(\text{NH}_2)_2)_y]^{3-y}$ , а также комплексов с нестабильными степенями окисления  $\text{Bi(II)}$  и  $\text{Bi(I)}$ , которые могут рассматриваться как интермедиаты в процессе стадийного электровосстановления исходных комплексов  $\text{Bi(III)}$ . Рассчитана структура комплексов при различных значениях  $x$  и  $y$ , а также на основе рассчитанных термодинамических параметров образования установлены наиболее стабильные формы комплексов.

Оценены стандартные электродные потенциалы отдельных стадий электровосстановления комплексов  $\text{Bi(III)}$ . В рамках современной квантово-механической теории диссоциативного электронного переноса в неадиабатическом приближении оценены активационные параметры элементарного акта стадийного электровосстановления и предложена схема, описывающая детальный механизм этого процесса.